

Solución Numérica de Ecuaciones Diferenciales Parciales

Manuela Bastidas* and Freddy H. Marín**

Abstract—Durante los últimos años los problemas de ingeniería de todas las índoles se han ido complicando de manera exponencial y cada vez se dificulta más encontrar soluciones analíticas para éstos; los métodos numéricos son entonces la manera de encontrar una solución teórica y práctica a problemas más complejos, con condiciones y geometrías tan variadas como se quiera. En éste trabajo se muestran dos aplicaciones del método de diferencias finitas explícitas para encontrar aproximaciones a la solución, pero además se realiza el análisis de las características del problema y del esquema numérico que garantizan una correcta implementación.

Index Terms—Diferencias finitas, Esquema numérico, Consistencia, Estabilidad, Convergencia, Ecuación KdV, Ecuación de Schrödinger.

I. INTRODUCTION

UNA cantidad significativa de problemas de orden científico y tecnológico se nos presentan diariamente y la modelización de fenómenos es precisamente el área que se encarga de encontrar las soluciones a dichos problemas, eso hace que ésta sea rama parte vital de la ciencia actual y es aquí donde son útiles las ecuaciones diferenciales parciales, modelan sistemas de evolución en los que se describe una dinámica a lo largo del tiempo y además pueden representar diversos objetos que van desde la posición de un satélite en el espacio hasta la dinámica de un átomo, pasando por los índices bursátiles o el grado en que una enfermedad afecta a la población.

La complejidad de los modelos que actualmente se han propuesto para reproducir la concepción humana de los sistemas dinámicos y que son descritos por una cantidad diversa de EDP'S (Ecuaciones diferenciales parciales) hace que la solución de dichos problemas sea analíticamente más complicada cada vez, además, la diversidad de los problemas obliga a que los métodos numéricos que encuentran soluciones aproximadas a los modelos sean más utilizados, tanto por la facilidad computacional como teórica y además, la precisión de dichos métodos ha ido aumentando significativamente de la mano de estudios que hacen que estos sean también confiables dadas ciertas características matemáticas específicas.

En particular, el método de diferencias finitas es un clásica aproximación para encontrar la solución numérica de las ecuaciones que plantean un modelo matemático de un sistema continuo, es decir, se plantea un problema aproximado que tiene características discretas. En una solución por diferencias

finitas, las derivadas que son parte fundamental de un modelo en forma de EDP son remplazadas por aproximaciones en diferencias, convirtiendo el planteamiento en un problema algebraico.

Son de nuestro interés avances y desarrollos en los planteamientos matemáticos de las diferencias finitas y sobre todo en la computación y la complejidad algorítmica de los mismos, basados en trabajos que se centran en solucionar ecuaciones diferenciales particulares. Ejemplos de lo anterior son la ecuación de Helmholtz que Erlangga, Y. solucionó proponiendo un esquema numérico de diferencias finitas de orden superior con dominios externos y haciendo un análisis estricto de las condiciones de frontera necesarias para lograr una discretización estable, y donde además se hace una transformación y simplificación del modelo absorbiendo propiedades y considerando condiciones de radiación. Por otra parte, uno más de los trabajos que es interesante resaltar, y en este caso por razones de interés general en el problema, es la publicación de Atanassov, E.I y su desarrollo numérico para solucionar el sistema de ecuaciones estocásticas planteadas por Heston para calcular el precio de una opción y por otra parte, el trabajo de Gandarias, M.L que por medio de modelos matematicamente simples establece y generaliza algunas características y particularidades de la ecuación KdV (Korteweg-de Vries), ecuación que físicamente describe la propagación de ondas en medios dispersivos como la superficie del agua en canales poco profundos, este trabajo está ampliamente relacionado con los desarrollos hechos por Duruflé, M.a. que utiliza e implementa el método de diferencias finitas para solucionar la ecuación KdV y propone un esquema numérico que considere cualidades físicas como la conservación de energía y además hace una valiosa comparación de dicho esquema con un planteamiento numérico basado en el método de Galerkin discontinuo que es usual en estudios relacionados a los elementos finitos y otros métodos más sofisticados con fuertes bases del análisis numérico.

Éste trabajo pretende estudiar el método de diferencias finitas explícitas y su posible aplicación en la solución de ecuaciones diferenciales parciales, realizar un par de implementaciones computacionales de dicho método numérico para resolver modelos típicos en la literatura y analizar las características teóricas de los esquemas propuestos.

Luego de hacer una revisión del estado del arte y estudiar el método de diferencias finitas explícitas para resolver ecuaciones diferenciales parciales, se proponen un par de problemas que es posible resolver utilizando discretizaciones simples, hacer un análisis de las características geométricas y matemáticas de los modelos, crear esquemas numéricos para

*Manuela Bastidas- Departamento de Ciencias Básicas, Universidad EAFIT, Medellín, Colombia, e-mail: mbastida@eafit.edu.co.

**Freddy H. Marín- Departamento de Ciencias Básicas, Universidad EAFIT, Medellín, Colombia, e-mail: fmarinsa@eafit.edu.co.

lograr resultados significativamente buenos, analizar todas las condiciones del esquema numérico: consistencia, estabilidad, convergencia, entre otras e implementar computacionalmente el método de diferencias finitas para resolver los modelos propuestos y analizar los resultados encontrados apartir de las simulaciones.

Por otra parte, el alcance de éste trabajo como se mencionó anteriormente se basa en la importancia que desde hace varios años la modelización de sistemas dinámicos ha tomado en las ciencias actuales, lo que implica la estructuración fuerte de ecuaciones diferenciales que abarquen en gran parte el comportamiento y cambios de estado de los modelos y sus sistemas asociados.

La solución de dichas ecuaciones diferenciales al igual que su planteamiento, progresivamente se ha hecho más compleja y es en este punto donde las soluciones numéricas se hacen fundamentales y los métodos sencillos que implican bajos costos computacionales toman fuerza, siendo el caso de las diferencias finitas, que durante muchos años han sido la forma de aproximarse a la solución exacta de una manera flexible y cómoda.

Desde la concepción de ingeniería matemática se entiende la importancia de los problemas de modelización aplicados a los fenomenos naturales, financieros, físicos, biológicos entre otros que son de nuestro interés. Para el desarrollo de éste trabajo son útiles e importantes las áreas de modelación y la fuerte componente matemática que implica conocimiento del planteamiento del problema, significado y solución de EDP's, además de nociones acerca de la discretización de problemas de ingeniería ya sea con fundamentos básicos del cálculo diferencial o más profundamente como con la simulación de sistemas dinámicos discretos y por último un alto componente computacional que permita la modelación y simulación de sistemas y soluciones numéricas de ésta índole.

Luego, el interés de éste trabajo más que en encontrar soluciones numéricas está en las condiciones naturales de las ecuaciones, es decir, en el análisis de las ecuaciones, el esquema numérico y sus características particulares.

Se considerarán algunos problemas y se espera solucionarlos numéricamente, en particular de estudiará el modelo planteado por la ecuación KdV que modela el comportamiento de solitones en medios no lineales y la ecuación de Schrodinger en una caja de potencial de la que resulta la amplitud de probabilidad de presencia para una partícula, ecuaciones que son de nuestro interés porque la cantidad de aplicaciones de éstas cuando se hace una correcta simulación en ciencia y en ingeniería son inimaginables para hacer desarrollos en base a las aproximaciones de la solución.

II. METODOLOGÍA

Para lograr el alcance de los objetivos que se han propuesto en este trabajo, la metodología planteada y seguida es la siguiente:

- 1) Hacer una revisión del estado del arte, es decir, basados en una cantidad confiable de trabajos anteriores encastrar la investigación hacia áreas del conocimiento del

interés particular de la ingeniería y la modelación matemática. De manera que las ecuaciones que el modelo que se plantea se aproxime correctamente a la realidad. Primero es importante introducir el concepto de aproximación que implementaremos y el método de diferencias finitas donde mediante un proceso de discretización, el conjunto infinito de números que representan la función o funciones incógnitas en el continuo es reemplazado por un número finito de parámetros, para hacer una aproximación útil del método se emplean las diferencias finitas que son expresiones matemáticas de la forma

$$f(x+b) - f(x+a)$$

Ahora bien, si una diferencia finita se divide por $(b-a)$ se obtiene una expresión similar al cociente diferencial, que se diferencia en que se emplean cantidades finitas en lugar de infinitesimales, es decir, las diferencias finitas se pueden orientar como un método numérico de aproximación a las derivadas. Normalmente se consideran solo tres formas de diferencias finitas: la anterior, la posterior y la central.

- a) Una diferencia progresiva, adelantada o posterior es una expresión de la forma

$$\Delta f(x) = f(x+h) - f(x)$$

- b) Una diferencia regresiva, atrasada o anterior es de la forma

$$\Delta f(x) = f(x) - f(x-h)$$

- c) Una diferencia central es la media de las diferencias anteriores y posteriores y está dada por

$$\Delta f(x) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2}$$

Diferencias finitas para resolver ecuaciones diferenciales: Para resolver ecuaciones diferenciales con condiciones iniciales por el método de diferencias finitas se diferencia la variable independiente x con dominio $[0,L]$, es decir, se construye un conjunto (grilla o malla) de $L+1$ puntos discretos igualmente espaciados $x_l (l = 0, 1, \dots, L)$, con $x_0 = 0, x_L = L$, y $x_{l+1} - x_l = \Delta x$. Luego se reemplazan aquellos términos de la ecuación diferencial que involucren diferenciación, por términos que contengan operaciones algebraicas. Este proceso trae implícito una aproximación y puede efectuarse mediante la utilización de aproximaciones en diferencias finitas para las derivadas de la función.

Aproximaciones a la derivada con diferencias finitas: Para hacer las primeras aproximaciones a derivadas con diferencias finitas es posible utilizar la serie de Taylor, donde:

$$f(x+h) = f(x) + f'(x)(h) + \frac{f''(x)(h)^2}{2!} + \dots \quad (1)$$

$$f(x-h) = f(x) - f'(x)(h) + \frac{f''(x)(h)^2}{2!} - \dots \quad (2)$$

Y usando unicamente los primeros tres términos de cada expresión y restando (1) de (2) resulta:

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h}$$

Con un error del orden: $O(h^2)$

O para la segunda derivada podría resultar:

$$f''(x) = \frac{f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)}{2h^2}$$

Con un error del orden: $O(h^3)$

Análogamente se opera para ecuaciones de mayor orden en una dimensión y para ecuaciones con derivadas parciales en más de una dimensión. Al aproximar al mayor orden posible una ecuación diferencial con una ecuación en diferencias, se pueden obtener mejores resultados, pero no se garantiza que el resultado sea “aceptable”, en un sentido amplio. Para precisar conceptos, es necesario formular algunas definiciones que son la clave de el análisis matemático que se realiza para cada uno de los problemas que proponemos.

Consistencia: Un esquema en diferencias se dice consistente si la ecuación discretizada tiende a la ecuación diferencial cuando h tiende a cero. Esto es relativamente fácil de verificar, dado que plantear el desarrollo en serie de Taylor es siempre posible.

Estabilidad: El esquema se dice estable si la diferencia entre la solución exacta y la numérica permanece acotada, ésta condición garantiza que los errores no se amplifican con el tiempo, es decir, controlar los errores de redondeo.

Convergencia: Consistencia y Estabilidad garantizan convergencia en un problema en el cual la solución en todo punto del dominio depende en forma continua de las condiciones iniciales, lo que implica que pequeñas perturbaciones en estas, producen pequeñas discrepancias en la solución

- 2) Las ecuaciones que se consideran apropiadas dados los objetivos y expectativas del trabajo y conociendo bien la teoría de las diferencias finitas son:

- Ecuación KdV (Korteweg-de Vries)

A grandes rasgos es la ecuación que describe la dinámica de las ondas solitarias (Solitones) que se propagan sin deformarse en un medio no lineal.

$$\frac{du(x,t)}{dt} + \epsilon u(x,t) \frac{du(x,t)}{dx} + \mu \frac{d^3 u(x,t)}{dx^3} = 0$$

Donde ϵ y μ son reales ponderadores de la no linealidad y la dispersión respectivamente.

- Ecuación de Schrödinger

Ecuación que soluciona la función de onda Ψ , que es la función que contiene toda la información que puede conocerse sobre la partícula y de la que resulta la amplitud de probabilidad de presencia de dicha partícula.

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} \right] + V\Psi$$

Donde \hbar (Constante de Planck), m es la masa, V es una función de energía potencial.

- 3) Elegimos el esquema numérico adecuado que se adapte al modelo, a las capacidades técnicas y a los alcances del proyecto, además de estudiar el método de diferencias finitas y como ha sido utilizado para solucionar las ecuaciones diferenciales parciales anteriormente propuestas.

- 4) Análisis de las características y condiciones del esquema numérico: consistencia, estabilidad, convergencia (entre otras, si es necesario) que son básicas para establecer una solución realmente aproximada y garantizar resultados de calidad, estas condiciones además son características básicas de las diferencias finitas y de las estructuras que se basan en la discretización de los modelos.

El tipo de problemas que se proponen para ser resueltos con métodos numéricos basados en discretizaciones deben cumplir ciertas características que garantizan el correcto análisis y el buen comportamiento de las soluciones.

La notación empleada usualmente es la siguiente:

- El problema se considera en una región Ω cerrada en un espacio abierto de una, dos o más dimensiones con coordenadas cartesianas, polares, cilíndricas, etc...
- La región Ω tiene frontera $\delta\Omega$
- La solución a encontrar es una función u de variables de espacio y el tiempo definida en $\Omega \times [0, T]$
- Las condiciones de frontera son valores de la función y las derivadas en toda o parte de la frontera de Ω y la cantidad y orden de dichas condiciones hace que el problema tenga o no tenga solución.

Típicamente las condiciones de frontera son de tres tipos:

- Condición de frontera de Dirichlet : Se especifica valores de la función en segmentos o puntos de la frontera.
- Condición de frontera de Neumann : Se especifican los valores de la derivada de una solución tomada sobre la frontera, indican entonces un flujo o cambio en dichos segmentos.
- Condición de frontera mixta : Combinaciones ponderadas o no ponderadas, por segmentos o puntos de la frontera, de las condiciones de Dirichlet (sobre la función) y condiciones de Neumann (sobre la derivada)

Las condiciones iniciales indican un valor de la función u en el tiempo $t = 0$ sobre todo el dominio Ω .

Consistencia, convergencia y estabilidad: Cuando se propone un problema para solucionar por medio de un esquema numérico con buenas y confiables cualidades

se debe primero garantizar que el problema está bien definido o bien propuesto (en el sentido de Hadamard), lo anterior es que una ecuación diferencial con valores iniciales tenga propiedades analíticas adecuadas y sus soluciones tengan una estructura conveniente.

En general, los problemas se dicen bien propuestos en el sentido de Hadamard si:

- a) Unicidad: las soluciones estrictas están determinadas unívocamente por las condiciones iniciales.
- b) Conjunto denso: el conjunto de todas las condiciones iniciales correspondientes a las soluciones posibles es denso en el espacio de Banach en el que se plantea problema.
- c) Acotación local: Para algún intervalo finito $[0, t_0]$ existe una constante K tal que cada solución estricta satisface la desigualdad: $\|u_t\| \leq K \|u_0\|$.

Tener un problema bien definido entonces significa que la solución depende continuamente de las condiciones impuestas sobre la frontera y es uniformemente cerrada en un intervalo compacto lo que hace entonces que todos los análisis posteriores sean más cómodos y tengan además un sentido más matemático garantizando así el correcto comportamiento de todo el esquema, para encontrar soluciones más aproximadas a las que se esperan de un desarrollo analítico pero de una manera más flexible y computacional.

Luego bien, las características que se deben garantizar para hacer confiables las soluciones obtenidas de un desarrollo numérico basado en diferencias, tratan del análisis asintótico del error e indican que un esquema numérico se comporta bien en todos los instantes y no hay posibilidades de soluciones inesperadas o no aproximadas correctamente.

Consistencia: Un esquema en diferencias se dice consistente si la ecuación discretizada tiende a la ecuación diferencial cuando Δ tiende a cero. En particular garantizar este correcto comportamiento de las ecuaciones es relativamente fácil de verificar, dado que plantear el desarrollo en serie de Taylor es siempre posible.

Dada una ecuación diferencial parcial y un esquema de diferencias finitas es posible asegurar que éste es un esquema consistente con la ecuación diferencial parcial si para cualquier función suave $\Phi(x, t)$ la diferencia entre la ecuación diferencial y la evaluación en la ecuación en diferencias converge puntualmente a 0 cuando $\Delta x, \Delta t$ convergen a 0. De donde resulta entonces que la consistencia significa que si u es una solución (suave) de una ecuación diferencial parcial, entonces u es una aproximación de la solución del esquema de diferencias finitas que aproxima la EDP.

En este punto es importante anotar que la consistencia es una condición necesaria para la convergencia de un esquema de diferencias finitas, sin embargo no todo esquema consistente será convergente.

Estabilidad: El esquema se dice estable si la diferencia entre la solución exacta y la numérica permanece acotada, ésta condición garantiza que los errores no se

amplifican con el tiempo, es decir, controlar los errores de redondeo.

Una interpretación de la estabilidad de un esquema de diferencias finitas es que: Para un esquema estable variaciones pequeñas en los valores de las condiciones iniciales originan errores pequeños en la solución.

En este caso lo relevante es asegurar la estabilidad de la solución numérica respecto de la analítica, que resulta ser, entonces, el criterio más general. Hablar de la estabilidad de la solución numérica respecto de la analítica, significa acotar de alguna manera la diferencia $|U(x_i, y_j, t_k) - U_{i,j}^k| < \infty$ cuando $k \rightarrow \infty$.

Para garantizar la estabilidad, sobretodo, cuando la solución analítica no se conoce a ciencia cierta, se implementan los análisis de estabilidad basados en funciones de Lyapunov, el método de Von Neumann basado en series de Fourier (que se usará en éste trabajo) u otros métodos de acotamiento que aprovechan los espacios normados a los que pertenecen en general las funciones que son solución de los problemas bien definidos en el sentido de Hadamard.

Convergencia: Se dice que una solución numérica converge a la solución analítica cuando, para cada punto (en el espacio de las variables independientes Ω), la primera tiende a la segunda al refinar la malla en la que se están haciendo los cálculos del esquema numérico propuesto. Es importante resaltar que la consistencia del esquema numérico es necesaria para que el error de truncamiento efectivamente disminuya al refinar la malla pero no es suficiente y para complementar el análisis es necesario demostrar que el problema en diferencias permanece estable.

Estos conceptos se expresan en el Teorema de Equivalencia de Lax-Richtmyer que se enunciará más adelante. La importancia entonces de éste resultado es que dado un problema de valores iniciales bien planteado y una aproximación en diferencias finitas que satisface la condición de consistencia, la estabilidad es una condición necesaria y suficiente para la convergencia que es por sí sola una condición complicada dado el análisis de la malla que requiere.

- 5) Implementación computacional del método de diferencias finitas, en Matlab, software que la universidad EAFIT dispone para los desarrollos investigativos de ésta índole, generando algoritmos de baja complejidad y fácil divulgación.
- 6) Análisis los resultados encontrados apartir de las simulaciones de los modelos propuestos, comparar los resultados obtenidos con los esperados ya sea con conocimiento previo del comportamiento de los sistemas, o con modelos de prueba como datos de validación, para de ésta misma manera garantizar experimentalmente que las aproximaciones son correctas.

III. RESULTADOS

Para presentar los resultados de éste trabajo es muy importante tener claro que la implementación y el análisis se realizó de manera disjunta para los dos problemas ya mencionados, entonces se presentan los resultados separados.

A. Resultados KdV

La ecuación de Korteweg-de Vries o KdV es una ecuación en derivadas parciales que incluye efectos de no linealidad y dispersión a la vez. Físicamente es un modelo que describe, en una dimensión espacial, la propagación de ondas de longitud de onda larga en medios dispersivos.

$$\frac{du(x,t)}{dt} + \epsilon u(x,t) \frac{du(x,t)}{dx} + \mu \frac{d^3 u(x,t)}{dx^3} = 0 \quad (3)$$

Donde ϵ y μ son reales ponderadores de la no linealidad y la dispersión respectivamente.

Con condiciones iniciales y de frontera :

$$\begin{aligned} u(x,0) &= f(x) & u(x_{min},t) &= g(t) \\ & & u(x_{max},t) &= h(t) \end{aligned}$$

$u(x,t)$ describe la elongación de la onda en el lugar y en el tiempo. KdV es no lineal debido al producto que se muestra en el segundo término y de tercer orden es a causa de la tercera derivada en el tercero. El término no lineal, es similar a la ecuación de onda término usual e implica que cuando $u(x,t)$ no varía demasiado, la onda se propaga con una velocidad proporcional; éste término además introduce la posibilidad de ondas de choque en la solución. Y por otra parte el término de tercer orden produce dispersión de ampliación que exactamente puede compensar el estrechamiento provocado por el término no lineal en condiciones adecuadas.

Para solucionar la ecuación KdV se propone entonces discretizar todo el dominio y encontrar por medio de un esquema numérico propio de las diferencias finitas una buena aproximación a la solución del comportamiento de las ondas.

Es posible escribir el dominio numérico como una discretización del espacio entre x_{min} y algún x_{max} elegidos y además discretizar el tiempo hasta T que será el instante donde nos interese la solución.

$$(x,t) \in [x_{min}, x_{max}] \times [0, T]$$

$$\begin{aligned} x_i &= x_{min} + i\Delta x & i &= 0, 1, \dots, S \\ t_j &= j\Delta t & j &= 0, 1, \dots, P \end{aligned}$$

La solución entonces se denotará $u(x,t) = U(x_i, t_j) = U_i^j$

Para lograr una aproximación en diferencias de la ecuación KdV se propone aproximar cada una de las derivadas parciales con aproximaciones en diferencias como se definieron antes entonces se tienen las aproximaciones a las derivadas centradas:

$$\frac{du(x,t)}{dt} = \frac{U_i^{j+1} - U_i^{j-1}}{2\Delta t}$$

$$\frac{du(x,t)}{dx} = \frac{U_{i+1}^j - U_{i-1}^j}{2\Delta x}$$

$$\frac{d^3 u(x,t)}{dx^3} = \frac{U_{i+2}^j - 2U_{i+1}^j + 2U_{i-1}^j - U_{i-2}^j}{2\Delta x^3}$$

De lo anterior se obtiene entonces un esquema numérico para la ecuación KdV en el dominio numérico propuesto, descrito por la ecuación

$$U_i^{j+1} = U_i^{j-1} - A U_i^j (U_{i+1}^j - U_{i-1}^j) \quad (4)$$

$$- B (U_{i+2}^j - 2U_{i+1}^j + 2U_{i-1}^j - U_{i-2}^j) \quad (5)$$

donde

$$A = \frac{\epsilon \Delta t}{3\Delta x} \quad y \quad B = \frac{\mu \Delta t}{\Delta x^3}$$

Gráficamente es posible ver que cada solución temporal y espacial de la ecuación KdV que resulta del esquema propuesto en la ecuación(5) depende de 6 puntos en el espacio (Ver. fig 1).

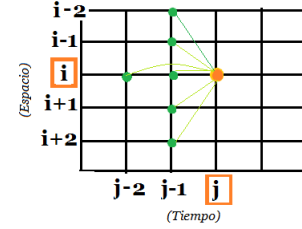


Figure 1. Esquema numérico - KdV

Siendo (5) un esquema numérico relativamente sencillo en el dominio discretizado, es computacionalmente fácil de implementar, pero dado que la ecuación KdV tiene restricciones por las condiciones de frontera y la geometría del problema, es recomendable analizar esquemas alternos para las fronteras, lo anterior se clarifica en la figura 2 donde se muestra que es posible crear esquemas con menos dependencias dada la rigidez del problema en las fronteras, y éstos se establecen en las ecuaciones (6) y (7).

Es importante resaltar que dichas modificaciones del esquema en las fronteras se logran implementando de otra manera las diferencias finitas, es decir, no haciendo siempre implementaciones centradas.

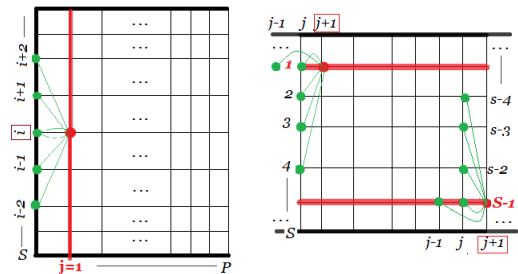


Figure 2. Esquema numérico (Fronteras) - KdV

$$U_i^f = U_i^{f-1} - \frac{\epsilon \Delta t}{6 \Delta x} U_i^f (U_{i+1}^f - U_{i-1}^f) - \frac{\mu \Delta t}{2 \Delta x^3} (U_{i+2}^f - 2U_{i+1}^f + 2U_{i-1}^f - U_{i-2}^f) \quad (6)$$

$$U_f^{j+1} = U_f^{j-1} - \frac{\epsilon \Delta t}{3 \Delta x} U_f^j (U_{f+1}^j - U_{f-1}^j) - \frac{2\mu \Delta t}{\Delta x^3} (U_{f+2}^j - 2U_{f+1}^j + 2U_{f-1}^j - U_{f-2}^j) \quad (7)$$

donde $f = 1 \text{ ó } s - 1$

Dada la metodología propuesta para éste trabajo, se estipula que luego de encontrar esquemas visiblemente buenos para lograr aproximaciones a la solución de la ecuación, se propone, como parte vital del trabajo, el desarrollo teórico de las propiedades de consistencia, estabilidad y consistencia (en éste caso) que fueron descritas anteriormente y que además son propias de los esquemas en diferencias.

- **Consistencia**

Un esquema en diferencias se dice consistente si la ecuación discretizada tiende a la ecuación diferencial cuando Δ tiende a cero.

Proof: Trivial (Por la misma construcción del esquema a partir de la ecuación diferencial, ésta propiedad se puede obviar) ■

- **Estabilidad**

Un esquema en diferencias se dice estable si la diferencia entre la solución exacta y la numérica permanece acotada, ésta condición garantiza que los errores no se amplifican con el tiempo.

Proof: Criterio de estabilidad de Von Neumann

Se considera una expansión en serie de Fourier del error en un punto concreto de la malla.

$$U^n(i) = A^n \exp(I[k_1 m(i\Delta x)]) \quad (8)$$

donde: A es el factor de amplificación o variación temporal, k_1 es un modulo de cambio en la coordenada x . Con lo anterior se puede construir una expresión recursiva para la solución en $(n+1)$ como sigue

$$U^{n+1}(i) = A^n U^n(i) \quad (9)$$

Al garantizar que la amplificación o variación temporal permanezca acotada y luego de realizar la respectiva expansión de (9) en términos del esquema numérico (5), se tiene que:

Siempre que $|A| \leq 1$ se obtiene una relación de estabilidad para las discretizaciones del tiempo y del espacio

$$\Delta t \geq \frac{3\Delta x}{2\epsilon}$$

- **Convergencia**

Se dice que una solución numérica converge a la solución analítica cuando la primera tiende a la segunda al refinar la malla.

Proof: Para probar que el esquema numérico propuesto para solucionar la ecuación KdV es convergente, se utiliza el siguiente teorema.

Teorema 1. (Teorema de Equivalencia de Lax-Richtmyer) Un esquema de diferencias finitas Consistente para una ecuación diferencial parcial tal que el problema de valor inicial es bien planteado es Convergente si y sólo si es Estable.

Es decir, dado que ya se han garantizado el planteamiento, la consistencia y la estabilidad del esquema, empleando el teorema de Lax, garantiza la convergencia de la solución numérica ■

1) *Caso particular :* Luego de haber garantizado, como buena práctica teórica todas las condiciones del esquema, para realizar la implementación se tomó el caso particular de la ecuación KdV

$$\frac{du(x,t)}{dt} - 6u(x,t) \frac{du(x,t)}{dx} + \frac{d^3 u(x,t)}{dx^3} = 0 \quad (10)$$

con condiciones de frontera

$$u(0,t) = u(S,t) = 0$$

$$u(x,0) = \frac{0,2}{2} \operatorname{sech}\left(\frac{\sqrt{0,2}}{2}x\right)^2$$

Se obtuvo como resultado la superficie de la figura 3. que muestra el comportamiento espacial-temporal de los solitones, con una discretización del espacio $\Delta x = 0,5$ y del tiempo $\Delta t = 0,0625$.

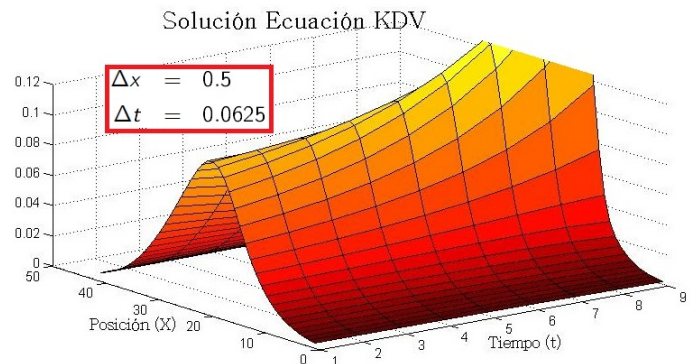


Figure 3. Superficie - KdV

Es importante además que los resultados obtenidos con el esquema numérico concuerden con los resultados obtenidos con otros métodos numéricos y aproximaciones a la solución exacta que se encontraron durante la revisión de la literatura, como la solución encontrada por Kolebaje, Olusola et.al. 2012.

B. Resultados Schrödinger

La ecuación de Schrödinger fue desarrollada por el físico austríaco Erwin Schrödinger en 1925. Describe la evolución temporal de una partícula masiva no relativista. Es de

importancia central en la teoría de la mecánica cuántica, donde representa para las partículas microscópicas un papel análogo a la segunda ley de Newton en la mecánica clásica. Generalmente se describe como sigue

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} \right] + V\Psi$$

Donde \hbar (Constante de Planck), m es la masa, V es una función de energía potencial.

En nuestro caso, implementamos el método de diferencias finitas en dos casos, para cajas de potencial cero en dos y tres dimensiones.

La partícula en una caja (también conocida como pozo de potencial infinito) es un problema muy simple que consiste de una sola partícula que rebota dentro de una caja inmóvil de la cual no puede escapar, y donde no pierde energía al colisionar contra sus paredes.

Por lo anterior se tienen las siguientes condiciones de frontera iguales a cero expresando el hecho de que la probabilidad de encontrar la partícula fuera de una caja de la que la partícula no puede escapar es cero.

$$\begin{aligned} \Psi(0, y, t) &= \Psi(L_x, y, t) = 0 \\ \Psi(x, 0, t) &= \Psi(x, L_y, t) = 0 \end{aligned}$$

Para discretizar el problema e implementar el método de diferencias finitas explícitas, se propone (como antes) un dominio numérico con el fin de discretizar el espacio y el tiempo

$$(x, y, t) \in [0, L_x] \times [0, L_y] \times [0, T]$$

$$\begin{aligned} x_j &= j\Delta x & j &= 0, 1, \dots, S \\ y_k &= k\Delta y & k &= 0, 1, \dots, P \\ t_n &= n\Delta t & n &= 0, 1, \dots, N \end{aligned}$$

denotando entonces la solución como sigue

$$\Psi(x, y, t) = \Psi(x_j, y_k, t_n) = \Psi_{j,k}^n$$

Con el mismo desarrollo anterior de cada una de las aproximaciones de las derivadas parciales, se obtiene el siguiente esquema numérico

- En 1 Dimensión

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{i}{2} \left[\frac{\Psi_{j+1,k}^n - 2\Psi_{j,k}^n + \Psi_{j-1,k}^n}{\Delta x^2} \right] + O(h) \quad (11)$$

- En 2 Dimensiones

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Psi}{\partial t} &= \frac{i}{2} \left[\frac{\Psi_{j+1,k}^n - 2\Psi_{j,k}^n + \Psi_{j-1,k}^n}{\Delta x^2} \right. \\ &\quad \left. + \frac{\Psi_{j,k+1}^n - 2\Psi_{j,k}^n + \Psi_{j,k-1}^n}{\Delta y^2} \right] + O(h) \quad (12) \end{aligned}$$

Para solucionar el esquema numérico (12) en la literatura se propone resolver la derivada temporal por medio de métodos

de Runge-Kutta que al igual que las diferencias finitas resultan de expansiones en series de Taylor y con éstos se obtienen muy buenos resultados en términos de costo computacional y convergencia de la solución, en nuestro caso, la derivada temporal se considera como una discretización simple (hacia atrás) del tiempo dado que es de nuestro interés particular el trabajo de las diferencias finitas sin la intervención de otros métodos, aunque cabe anotar que sí garantizamos que, dada la revisión de la literatura, no nos alejamos mucho de las precisiones que se obtienen con métodos más sofisticados (R. Becerril, et.al 2008).

Gráficamente es posible ver que cada solución temporal y espacial de la ecuación KdV resultante del esquema propuesto en la ecuación (11) depende de 3 puntos en el espacio cuando se analiza en 1 dimensión (Ver. figura 4). Resaltando que en éste caso, se construyeron las ecuaciones en diferencias de manera que no haya problemas en las fronteras empleando diferencias hacia atrás y no centradas como en la implementación anterior.

Analogamente funciona el esquema numérico de manera gráfica para la ecuación en 2 dimensiones.

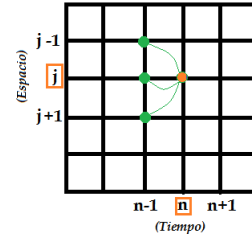


Figure 4. Esquema numérico 1D - Schrödinger

Luego de tener el esquema numérico se realiza entonces (de manera análoga a la ecuación KdV), las pruebas de consistencia, de estabilidad y de convergencia del esquema y de la solución propuesta que son vitales para éste trabajo.

En particular, se construye una prueba generalizada en 2 dimensiones para la estabilidad

- Estabilidad

Proof: Criterio de estabilidad de Von Neumann

Se Considera una expansión en serie de Fourier del error en un punto concreto de la malla como se había indicado antes

$$\Psi^n(i) = A^n \exp \left(I[\bar{k}_1 m(i\Delta x) + \bar{k}_2 m(j\Delta y)] \right) \quad (13)$$

donde: A es el factor de amplificación o variación temporal, k_i es un modulo de cambio en la coordenada x o y respectivamente.

Con lo anterior se puede construir una expresión recursiva para la solución en $(n+1)$ como sigue

$$\Psi^{n+1}(i) = A^n \Psi^n(i) \quad (14)$$

Al garantizar que la amplificación o variación temporal permanezca acotada y luego de realizar la respectiva expansión de (14) en términos del esquema numérico (12), se tiene que naturalmente el esquema mismo garantiza la estabilidad

en términos de Δx y Δy para valores significativamente pequeños. ■

Resaltamos que como condición inicial de cada uno de los casos particulares que se mostrarán, se tomó la solución exacta dado que, no existe otra manera de simular el comportamiento de una partícula en el tiempo $t = 0$, y cabe anotar que las soluciones analíticas iniciales fueron construidas por el autor.

1) *Caso particular* : Solución numérica para la ecuación de Schrodinger 1D en una caja de potencial.

Condicion inicial ($t = 0$)

$$\Psi_{n_x}(x) = \sqrt{2} \cos(E_{n_x} t) \sin(n_x \pi x) \quad (15)$$

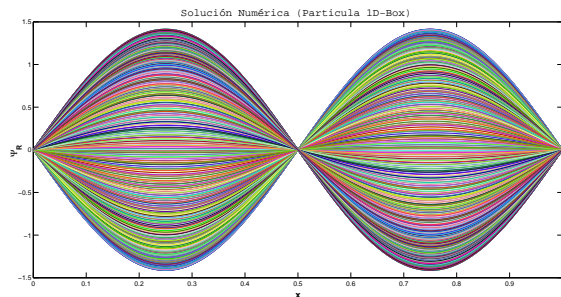


Figure 5. Solución numérica $n_x = 2$, $\Delta x = 0.01$, $\Delta t = 0.0001$

En la figura 5. se muestra entonces en diferentes colores cada una de las amplitudes de probabilidad o funciones de onda que son solución en cada instante del tiempo de la parte real de la ecuación de Schrödinger, resaltando además que se ha tomado $n_x = 2$ es decir, 2 modos de vibración para la condición inicial del problema y de donde surgen ambos picos de la gráfica.

La interpretación física y matemática del resultado anterior se dificulta bastante dado que su significado toma mucha más fuerza al leer la densidad de probabilidad asociada al espacio, que además es independiente del tiempo y se encuentra como el complejo conjugado de la función de onda.

$$\rho = |\Psi^* \Psi|$$

Dicha función de densidad de probabilidad se muestra en la figura 6. y efectivamente resulta ser independiente del tiempo como se esperaba.

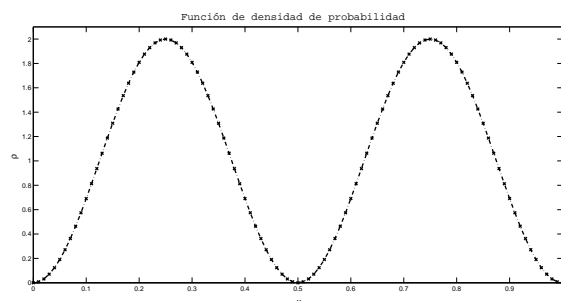


Figure 6. ρ Independiente del tiempo

Los resultados obtenidos para la ecuación de Schrödinger en 1D en una caja de potencial coinciden además con la solución exacta y con los resultados aproximado que se revisaron en la literatura.

2) *Caso particular* : Solución numérica para la ecuación de Schrodinger 2D en una caja de potencial

Condicion inicial ($t = 0$)

$$\Psi_{n_x, n_y}(x, y) = 2 \cos(E_n t) \sin(n_x \pi x) \sin(n_y \pi y) \quad (16)$$

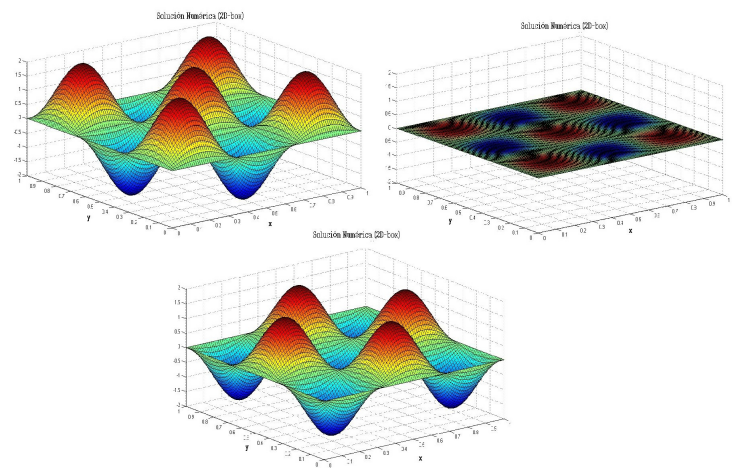


Figure 7. Solución numérica $n_x = n_y = 3$, $\Delta x = \Delta y = 0.01$, $\Delta t = 0.0001$

En la figura 7. se muestra en 3 tiempos (uno inicial, uno medio, y uno final) la solución de cada una de las amplitudes de probabilidad o funciones de onda que son solución de la ecuación de Schrödinger en 2 dimensiones, resaltando además que se ha tomado $n_x = n_y = 3$ es decir, 3 modos de vibración en cada una de las dimensiones espaciales para la condición inicial del problema y de donde surgen los picos de la gráfica.

La interpretación física del resultado anterior se dificulta bastante dado que su significado toma mucha más fuerza al leer la densidad de probabilidad asociada al espacio y que además es independiente del tiempo y se encuentra como el complejo conjugado de la función de onda.

$$\rho = |\Psi^* \Psi|$$

Dicha función de densidad de probabilidad se muestra en la figura 8. y efectivamente resulta ser independiente del tiempo como se esperaba.

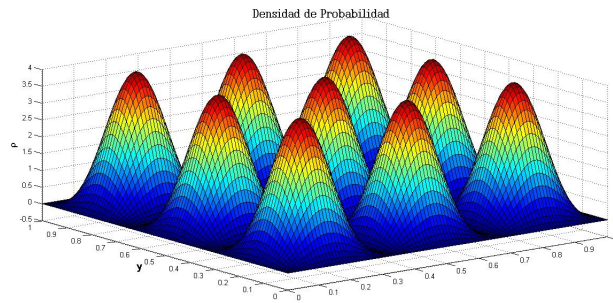


Figure 8. ρ Independiente del tiempo

Los resultados obtenidos para la ecuación de Schrödinger en 2D en una caja de potencial también coinciden con la solución exacta y con los resultados aproximados que se revisaron en la literatura.

IV. CONCLUSIONES

- Los métodos numéricos realmente son una manera aplicable de encontrar aproximaciones a la solución y se convierten en una herramienta muy útil cuando se trata de comprender algunos comportamientos o fenómenos. Como resultado de este trabajo se tienen un conjunto de desarrollos en términos de la formación matemática y de la aplicabilidad de la ingeniería a favor de resolver problemas de manera teórica y computacional.
- El método de diferencias finitas a pesar de ser un método simple, basado en la teoría de las series de Taylor y la definición de derivada, resulta ser muy bueno para representar las variaciones temporales y espaciales de los fenómenos físicos.
- Es muy importante, además de tener aproximaciones buenas a la solución analítica por medio de métodos numéricos, analizar dichos esquemas, es decir, aprovechar la flexibilidad matemática de los métodos numéricos y anticiparse a mejoras en las implementaciones computacionales, lo anterior es una buena práctica teórica y además minimiza las probabilidades de errores al momento de simular los fenómenos.
- No todas las características de los métodos numéricos (positividad, monotonía...) se deben garantizar en cada problema a resolver, dado que la naturaleza del modelo indica que la solución cumple o no con determinadas condiciones, por otra parte, es de vital importancia entonces el análisis del planteamiento del problema, el conocimiento de la EDP que lo describe, las condiciones y la geometría sobre las que se trabaja.
- Ecuaciones que son muy populares en la física y que tienen una cantidad innumerable de aplicaciones como las aquí resueltas (Ecuación KdV y Ecuación de Schrödinger) se interpretan en muchos casos de una forma más cómoda cuando se obtiene para ellas una aproximación y sobretodo una forma de visualizarlas ya que la matemática que se suele utilizar en las soluciones

analíticas es en muchos casos no triviales tediosa y extensa.

- La importancia de garantizar siempre que los esquemas numéricos cumplan con las condiciones básicas de construcción y comportamiento radica en que la comodidad al momento de la implementación es mucho mayor, se pueden asegurar condiciones sobre las mallas y sobre los parámetros y además se puede defender la solución teóricamente.
- La ecuación KdV ha sido resuelta por medio de muchos métodos numéricos y dada la estricta revisión bibliográfica que se hizo para realizar este trabajo, es posible asegurar que las diferencias finitas explícitas en términos de simplicidad tanto matemática como computacional, de esfuerzo y de resultados, son uno de los métodos más eficientes, que (por lo menos en el caso particular aquí expuesto) logra interpretar la difusión y todas las no linealidades en pasos muy pequeños del espacio y del tiempo.
- Por otro lado, la ecuación de Schrödinger que como se mencionaba, es una de las ecuaciones más importantes de la física moderna, también suele resolverse por medio de muchos métodos numéricos, y además tiene solución exacta en los casos particulares que se trabajaron, y conociendo estas condiciones, el método de diferencias finitas resultó ser eficiente y eficaz para solucionarla, ya que los resultados obtenidos son altamente semejantes a lo analítico y además el esquema propuesto cumple con las condiciones para garantizar el comportamiento correcto de las soluciones.
- Se puede entonces asegurar que con el método de diferencias finitas explícitas se pueden construir soluciones muy aproximadas a las analíticas, y se pueden simular comportamientos lineales y no lineales siempre y cuando se garantice previamente la consistencia, convergencia y estabilidad de la solución y del esquema.

REFERENCES

- [1] J. Strikwerda, *Finite difference schemes and partial differential equations*. Society for Industrial Mathematics, 2004.
- [2] A. Capella Kort and J. Sarrate Ramos, "Estudio numérico del control exacto desde el contorno de la ecuación Korteweg de Vries lineal," *Revista internacional de métodos numéricos*, 2003.
- [3] W. Hui-Ping, W. Yu-Shun, and H. Ying-Ying, "An explicit scheme for the KdV equation," *Chinese Physics Letters*, vol. 25, no. 7, 2008.
- [4] R. Becerril, F. S. Guzmán, A. Rendón-Romero, and S. Valdez-Alvarado, "Solving the time-dependent Schrödinger equation using finite difference methods," *Revista mexicana de física E*, vol. 54, no. 2, 2008.
- [5] M. G. Vázquez and Capetillo, "Simulaciones numéricas de la ecuación del calor: diferencias finitas."
- [6] M. Duruflé and S. Israwi, "A numerical study of variable depth KdV equations and generalizations of Camassa-Holm-like equations," *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 2012.
- [7] A. C. Vliegthart, "On finite-difference methods for the Korteweg de Vries equation," *Journal of Engineering Mathematics*, vol. 5, no. 2, 1971.
- [8] B. F. Feng and T. Mitsui, "A finite difference method for the Korteweg de Vries and the Kadomtsev-Petviashvili equations," *Journal of computational and applied mathematics*, vol. 90, no. 1, 1998.
- [9] P. Mercader, J. Torres, M. J. Núñez, J. M. Zamarro, E. Martín, and G. J. Molina-Cuberos, "Resolución numérica de la ecuación de Schrödinger. Introducción al estudio de la teoría de bandas."
- [10] J. R. Nagel, "The one-dimensional finite-difference time-domain (FDTD) algorithm applied to the Schrödinger equation."

- [11] Y. Erlangga and E. Turkel, "Iterative schemes for high order compact discretizations to the exterior helmholtz equation," *ESAIM: Mathematical Modelling and Numerical Analysis*, vol. 46, no. 03, 2012.
- [12] C. E. Froberg and C. E. Frhoberg, *Introduction to numerical analysis*. Addison-Wesley Publishing Company, 1969.
- [13] A. Iserles, *A first course in the numerical analysis of differential equations*. Cambridge University Press, 2008, vol. 44.
- [14] J. C. Strikwerda, *Finite Difference Schemes and Partial Differential Equations*. SIAM, Philadelphia, 1994.
- [15] K. W. Morton and D. F. Mayers, *Numerical Solution of Partial Differential Equations: An Introduction*. Cambridge University Press, Apr. 2005.
- [16] S. Jamrud Aminuddin, "Numerical solution of the korteweg de vries equation."
- [17] O. T. Kolebaje and O. E. Oyewande, "Numerical solution of the korteweg de vries equation by finite difference and adomian decomposition method," *International Journal of Basic and Applied Sciences*, vol. 1, no. 3, 2012.
- [18] M. L. Gandarias and M. S. Bruzón, "Some conservation laws for a forced KdV equation," *Nonlinear Analysis: Real World Applications*, 2012.
- [19] E. Atanassov and S. Ivanovska, "Sensitivity study of heston stochastic volatility model using GPGPU," *Large-Scale Scientific Computing*, 2012.